

1. Изучать и оценивать взаимодействия инфраструктуры городского хозяйства необходимо комплексно, т. к. это позволит более точно планировать их совместную деятельность, а с точки зрения результативности и в совокупности обеспечить комплексное экономическое и социальное развитие инфраструктуры городского хозяйства и города в целом.

2. Результаты комплексного изучения и оценки взаимодействия инфраструктуры городского хозяйства предлагается учитывать при разработке концепции социально-экономического развития города, на основе которой затем утверждается программа социально-экономического развития города.

...

1. Елисеев А.М., Волчкова И.В., Подопригора Ю.В. Проблемы межотраслевых взаимодействий в контексте экономического развития территорий (на примере сибирского федерального округа) // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Экономические науки = St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Economics. 2009. Т. 6–2. № 90. С. 40–44.

2. Уфимцева Е.В. Исследование инфраструктуры городского хозяйства в аспекте территориальных социально-экономических процессов // Экономическое возрождение России. 2014. № 2. С. 85–92.

3. Dziembowski Z. Pojecie infrastruktury i jej charakterystyka // Miasto. 1966. № 2.

4. Ginsbert-Gebert A. Infrastruktura i jej rola w rozwoju miast. Gdansk, 1972. 38 p.

---

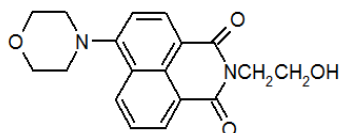
**Фалалеева Т.В., Дистанов В.Б.**  
**Квантово-химические расчеты**  
**замещенных 4-морфолинафталимида**

*НТУ «ХПИ», г. Харьков, Украина*

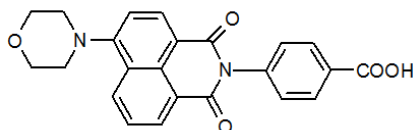
Одно из перспективных направлений применения 4-замещенных нафталимидов является использование их в качестве флуоресцентных зондов для медико-биологических исследований. Тем более, что некоторые производные этого класса соединений оказались эффективными для ранней диагностики патологических изменений крови человека при беременности разной тяжести и тиреотоксикозов.

Учитывая, что производные нафталевой кислоты по своим характеристикам полностью соответствуют возможности их использования в этом направлении целью данной работы является исследование некоторых водорастворимых производных 4-морфолинафталевой кислоты.

Для более качественного подхода к исследованиям медико-биологических возможностей флуоресцентных зондов, необходимо сделать несколько предварительных квантово-химических расчетов люминофоров. В качестве таких соединений нами были выбраны ранее синтезированные замещенные 4-морфолинафталимида (1,2) [1-5].



соединение 1



соединение 2

Такие расчеты дают возможность определить насколько предложенные соединения будут эффективными при взаимодействии с белком.

Во-первых, геометрическое и пространственное строение соединений моделировалось всевалентным полуэмпирическим методом AM1, а также методом молекулярной механики с поправкой на эффекты сопряжения в рамках  $\pi$ -электронного приближения VESCF в силовом поле MMX-M, реализованного в пакете PCModel и показана на рисунках 1,2.

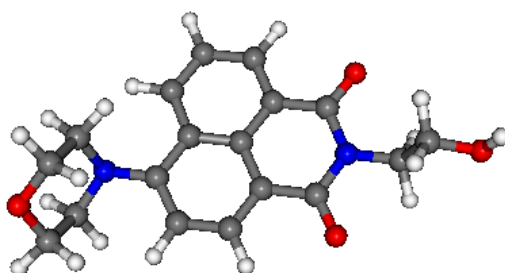


Рис. 1. Геометрическое строение N- $\beta$ -оксиэтил-4-морфолинафталимида

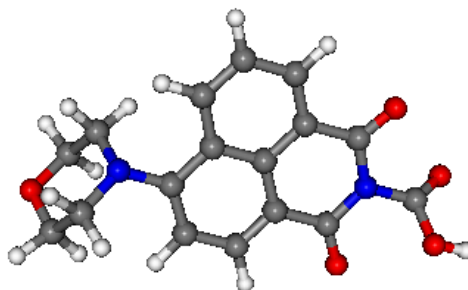


Рис. 2. Геометрическое строение N-(п-карбоксифенил)-4-морфолинафталимида

Во-вторых, необходимо было определить полярность соединений, дипольный момент, чувствительность к полярности среды, геометрические размеры молекул и их заряд, а также способность к образованию водородных связей. Эти данные приведены в таблице.

**Таблица. Квантово-химические расчеты синтезированных соединений**

	потенциал ионизации, эВ	заряд	Дипольный момент, Д	изменение дипольного момента при возбуждении, Д	молекулярные размеры, Å*				макс. количество ММ водородных связей связей***
					a	b	c	средне-геометрич. диаметр**	
I	8.98	0	5.34	4.06	13.07	7.23	5.13	7.86	5
II	9.12	0	7.03	4.64	11.75	7.47	4.33	7.24	6

\* молекулярные размеры (molecular dimensions) рассчитаны с учетом Ван-дер-Ваальсовых радиусов атомов.

\*\* средне-геометрический диаметр определяли как корень кубический умножения молекулярных размеров –  $r = \sqrt[3]{a \times b \times c}$

\*\*\* количество водородных связей, которые получили в результате следующих расчетов: один карбонильный (в том числе карбоксильной группы) или эфирный кислород – одна водородная связь.

На основе проведенных квантово-химических расчетов, можно сделать следующие выводы:

– дипольный момент соединений 1 и 2 при возбуждении возрастает в 1.76 и 1.66 раза, соответственно;

– рассмотренные соединения должны быть чувствительными к полярности среды (Даная информация может быть получена только после сольватофлуорохромных исследований).

...

1. В.Б. Дістанов, В.Ф. Берданова., В.А. Шаповалов та ін. Синтез та дослідження похідних карбонових кислот – потенційних біологічно-активних речовин. 1. Синтез похідних 4-мофолінонафталіміду // Вісник фармації. 1999. № 1 (19). С. 17-20.

2. В.Б. Дістанов, О.М. Гаврилiна ,А.Д. Рошаль та ін. Синтез та дослідження деяких похідних 4-морфолінонафталенової кислоти // Фундаментальні та прикладні дослідження в сучасній хімії: Матеріали Міжнародної заочної наук. практ. конф. молодих учених. Ніжин, 2014. С. 49-53.

3. Э.А. Ромоданова, В.А.Гаврик, А.Д. Рошаль и др. Изменение конформации САЧ под влиянием замораживания и лазерного излучения по данным флуоресценции производного нафталеновой кислоты // Проблемы криобиологии. 2000. № 3. С. 28-32.

4. Дистанов В.Б., Фалалеева Т.В. Синтез и исследование производных 4-морфолинонафталеновой кислоты в качестве флуоресцентных зондов для определения качества крови // Сб. научн. Трудов по материалам научно-практической конференции «Наука и образование в XXI веке». Тамбов. 2014. Ч. 15. С. 52-53.

5. Фалалева Т.В., Дистанов В.Б. Синтез и компьютерное прогнозирование биологической активности некоторых производных 4-морфолинонафталеновой кислоты // Сб. научн. Трудов по материалам научно-практической конференции «Теоретические и прикладные вопросы науки и образования:». Тамбов. 2015. Ч. 14. С. 135-138.

---

**Фомина Т.П., Масленков А.Е.**  
**Подготовка учащихся девярых и десятых**  
**классов к олимпиадам по математике**

*ФГБОУ ВПО «ЛГПУ», г. Лунецк*

Умение решать задачи является одним из показателей развитости математического мышления ученика. В решении задач оценивается, прежде всего, математическая правильность, однако приветствуется и рациональность решения, а